

УДК 538.9/669.1

**А. А. Свиридова, А. А. Лебедева, С. Б. Рыбалка, О. А. Шишкина,
О. В. Щербакова**

Брянский государственный технический университет, г. Брянск

kineticx@bk.ru (почта организации)

РАСЧЕТ ИЗОТЕРМИЧЕСКОЙ КИНЕТИЧЕСКОЙ ДИАГРАММЫ ФАЗОВОГО ПРЕВРАЩЕНИЯ В СПЛАВЕ $\text{Sm}_2\text{Fe}_{17}$

Кинетика индуцированного водородом прямого фазового превращения в магнитном сплаве $\text{Sm}_2\text{Fe}_{17}$ проанализирована в рамках кинетической модели Колмогорова. Получено кинетическое уравнение в рамках кинетической теории фазовых превращений Колмогорова, «хорошо описывающее» изотермическую кинетическую диаграмму прямого фазового превращения в сплаве $\text{Sm}_2\text{Fe}_{17}$ в зависимости от температуры превращения.

Ключевые слова: кинетика, фазовые переходы, магнитные сплавы

**A. A. Sviridova, A. A. Lebedeva, S. B. Rybalka, O. A. Shishkina,
O. V. Shcherbakova**

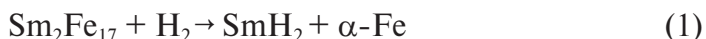
ISOTHERMAL KINETIC DIAGRAM CALCULATION OF PHASE TRANSFORMATION IN $\text{Sm}_2\text{Fe}_{17}$ ALLOY

The kinetics of the hydrogen induced direct phase transformation in $\text{Sm}_2\text{Fe}_{17}$ magnetic alloy has been analyzed in framework of Kolmogorov's kinetic model. It is obtained the kinetic equation on the basis of Kolmogorov's kinetic theory of the phase transformations that well described the isothermal kinetic diagram of direct phase transformation in $\text{Sm}_2\text{Fe}_{17}$ alloy in dependence on transformation temperature.

Key words: kinetics, phase transitions, magnetic alloys

Соединения интерметаллидов типа R_2M_{17} ($\text{R} = \text{Er}, \text{Sm}, \text{Y}, \text{Dy}, \text{Ho}, \text{Gd}$) демонстрируют ряд весьма интересных магнитных явлений при их взаимодействии с атомами внедрения ($\text{H}, \text{N}, \text{C}, \text{B}$) [3–5]. Например, новая перспективная технология, известная как HDDR-процесс (Hydrogenation-Decomposition-Desorption-Recombination) [1], была применена для обработки магнитотвердых сплавов типа R_2M_{17}

($\text{Sm}_2\text{Fe}_{17}$, $\text{Sm}_2\text{Co}_{17}$ и др.) для постоянных магнитов, и позволила улучшить их структуру и магнитные свойства путем индуцированных водородом обратимых фазовых превращений [1]. В частности, при HDDR-обработке в сплаве $\text{Sm}_2\text{Fe}_{17}$ происходит индуцированное водородом прямое фазовое превращение (в атмосфере водорода и при температурах выше 400°C) с распадом исходного сплава $\text{Sm}_2\text{Fe}_{17}$ на гидридную фазу SmH_2 и α -фазу Fe по следующей фазовой схеме [1; 2]:



Обратное фазовое превращение происходит в вакууме при эвакуации водорода из распавшегося сплава и сопровождается процессами рекомбинации распавшихся фаз в исходную фазу $\text{Sm}_2\text{Fe}_{17}$ [1].

Исследование кинетики указанных выше фазовых превращений, индуцированных водородом, позволит в дальнейшем контролировать микроструктуру и магнитные свойства этого сплава. Далее для последующего анализа механизма развития превращения была использована теория Колмогорова [3]. В соответствии с теорией Колмогорова, доля превращения f в зависимости от времени превращения t может быть описана следующим выражением:

$$f = 1 - \exp(-kt^n), \quad (2)$$

где t — время превращения, k и n — кинетические константы.

Известно, что если экспериментальные результаты кинетики перестроить в координатах $\ln [-\ln (1 - f)] - \ln t$, то возможно определить константу n , которая дает важную информацию о наиболее вероятных механизмах превращений [3]. При этом подобные зависимости имеют, как правило, два линейных участка [2; 3] с двумя разными значениями кинетической константы n , т. е. n_1 — до $\sim 0,5$ степени превращения и n_2 — после $0,5$ степени превращения. Фактически это означает смену механизма развития превращения, т. е. примерно до $0,5$ степени превращения оно контролируется скоростями зарождения и роста новых фаз, а после $0,5$ степени превращения контролируется в основном скоростью роста новых фаз. Таким образом, можно полагать, что обнаруженное изменение значения кинетической константы n обусловлено сменой механизма превращения, т. е. примерно до $\sim 0,5$ степени превращения превращение контролируется скоростями зарождения и роста новой фазы $\alpha\text{-Fe}$, а после $0,5$ степени превращения — в основном контролируется только скоростью роста новой фазы $\alpha\text{-Fe}$. Ранее было установлено, что значения константы n после $0,5$ степени превращения

близки к 0,5 [2], что в соответствии с классификацией Кристиана [3] характерно для превращений с диффузионно-контролируемой скоростью роста центров новой фазы. Можно полагать, что исследованные индуцированные водородом прямые фазовые превращения в сплаве $\text{Sm}_2\text{Fe}_{17}$ контролируются диффузией атомов железа к растущим центрам новой фазы $\alpha\text{-Fe}$. Далее кинетический коэффициент k может быть записан в зависимости от температуры следующим образом [3]:

$$k \approx a T e^{-\frac{U}{RT}}, \quad (3)$$

где T — температура (К), R — универсальная газовая постоянная, U — энергия активации превращения, a — константа, зависящая от температуры. Зависимость кинетического коэффициента k от температуры T показана на рис. 1. Подставив (3) в (2), можно получить уравнение для времени превращения t в зависимости от температуры T и степени превращения f :

$$t = \left(\frac{\ln\left(\frac{1}{1-f}\right) e^{\frac{U}{RT}}}{aT} \right)^{1/n}, \quad (4)$$

где t — время превращения (с), T — температура (К), $R = 8,31$ Дж/(моль \times К), полагая $U = 250$ кДж/моль (энергия активации диффузии атомов Fe), $a = 1,27 \times 10^9$ (с $^{-1} \times$ К $^{-1}$) (определена из рис. 1) и кинетическая константа $n = 0,5$.

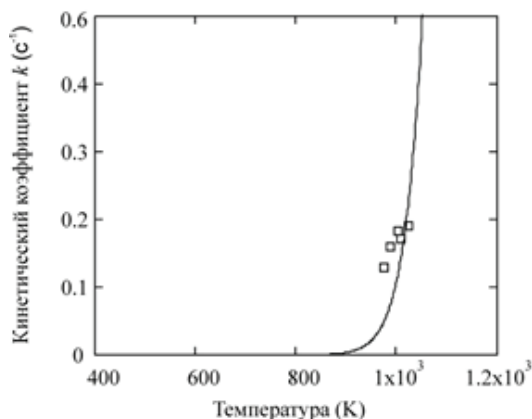


Рис. 1. Зависимость k от температуры превращения T для прямого фазового превращения в сплаве $\text{Sm}_2\text{Fe}_{17}$

Построенная по уравнению (4) изотермическая кинетическая диаграмма фазового превращения в сплаве $\text{Sm}_2\text{Fe}_{17}$ показана на рис. 2.

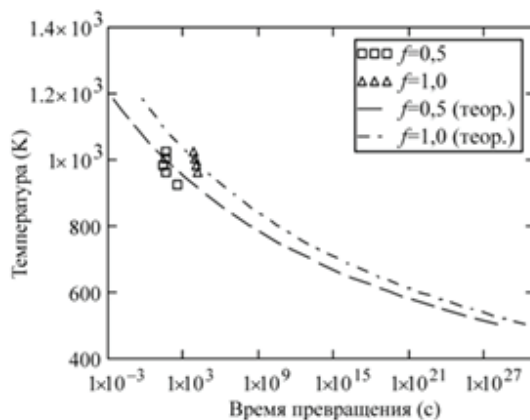


Рис. 2. Изотермическая кинетическая диаграмма прямого фазового превращения в сплаве $\text{Sm}_2\text{Fe}_{17}$ рассчитанная по уравнению (4) для различных степеней превращения f (точки — экспериментальные данные)

Таким образом, показано, что на основе уравнения (4) может быть рассчитана изотермическая кинетическая диаграмма индуцированного водородом прямого фазового превращения в сплаве $\text{Sm}_2\text{Fe}_{17}$ на стадиях превращения более 0,5, что важно с практической точки зрения.

Литература

1. Liu Yi, Sellmyer D. J., Shindo D. Handbook of Advanced Magnetic Materials. Boston: Springer, 2006. 1802 p.
2. Рыбалка С. Б., Додонова Е. В., Скоков К. П. Кинетика роста новых фаз в ходе фазовых превращений индуцированных водородом в магнитотвердом сплаве $\text{Sm}_2\text{Fe}_{17}$ // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: Математика. Механика. Физика. 2011. № 32. С. 109–114.
3. Christian J. W. The Theory Transformations in Metals and Alloys. Oxford : Pergamon Press, 2002. 1193 p.